

УДК 519.624.2

**СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ В
ТЕХНИЧЕСКИХ МИКРОСИСТЕМАХ¹⁾****Ю.Н. КАРАМЗИН, Т.А. КУДРЯШОВА, С.В. ПОЛЯКОВ***Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН**E-mail piv2964@mail.ru, popov@imamod.ru; friazinov@imamod.ru***SUPERCOMPUTER SIMULATION OF NONLINEAR PROCESSES IN TECHNICAL
MICROSYSTEMS****Yu.N. KARAMZIN, T.A. KUDRYASHOVA, S.V. POLYAKOV***Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS***Аннотация**

В представляемой работе развивается численный подход к моделированию нелинейных процессов в технических системах малого размера. Физика функционирования подобных систем описывается целой иерархией математических моделей, спускающейся вплоть до атомарного уровня. В результате такого объединения появляется возможность точного предсказания свойств моделируемых объектов и процессов. В работе рассматривается задача сверхзвукового холодного напыления наночастиц на подложку, актуальная для многих направлений нанотехнологии. Для численного анализа задачи предложен комбинированный подход, сочетающий в себе сеточное моделирование газодинамических процессов на макроуровне с помощью уравнений газовой динамики, в которых коэффициенты и отдельные члены определяются методами молекулярного моделирования. В основе подхода лежит расщепление по физическим процессам и масштабам. В проведенном исследовании предложены смешанная математическая модель взаимодействия газовой смеси с металлическими поверхностями, развиты численные методы и разработана параллельная реализация основных компонентов модели. Проведенные численные эксперименты показали преимущества и проблемные места предлагаемого подхода.

Ключевые слова: Численные методы, суперкомпьютерное моделирование, нелинейные процессы, микро- и наносистемы.

Summary

In represented work numerical approach to modeling of nonlinear processes in technical systems of low size is developed. The physics of functioning of similar systems is described with the help of hierarchy of mathematical models which is going down up to atomic level. As a result of such approach there is a possibility of very exact prediction of properties of modelled objects and processes. In work the problem of the supersonic cold is considered dusting of nanoparticles on the substrate, that is very actual for many directions of nanotechnology. For the numerical analysis of a task the combined approach is offered grid computations of gasdynamic processes at macrolevel by means of gas dynamics equations. The coefficients in these macro-equations are defined by methods of molecular modeling. At the center of approach a splitting on the physical processes and scales is placed. In the work a mixed mathematical model of interaction of gas mix with metal surfaces is offered, and numerical methods and parallel algorithms and programs are developed. The fulfilled numerical experiments showed advantages and difficulties of the proposed approach.

Key words: Numerical methods, supercomputer simulation, nonlinear processes, micro- and nanosystems.

Введение

Настоящая работа посвящена развитию численных подходов к моделированию нелинейных процессов в технических системах малого размера или микроэлементах больших систем. Физика функционирования подобных систем описывается целой иерархией математических моделей, спускающейся вплоть до

¹⁾Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 12-01-00339-а, 13-01-12073-офи-м, 14-01-00663-а).

атомарного уровня. В результате такого объединения появляется возможность очень точного предсказания свойств моделируемых объектов и процессов. Однако при этом существенно повышается уровень вычислительной сложности конкретных задач, что становится преодолимым лишь при использовании очень мощных компьютеров и суперкомпьютеров.

В качестве примера рассматривается проблема сверхзвукового холодного газового напыления (СХГН) наночастиц на подложку [1, 2]. Данная задача актуальна для многих направлений нанотехнологии, в том числе, для производства новых материалов для электроники и медицины. В работе предлагается комбинированный подход, сочетающий в себе моделирование газодинамических процессов на макроуровне с помощью уравнений газовой динамики, а также молекулярное моделирование на микро- и наноуровнях. В основе подхода лежит расщепление по физическим процессам и масштабам, сеточные методы и методы молекулярной динамики. В проведенном исследовании предложены смешанная математическая модель, развиты численные методы и разработана параллельная реализация основных элементов модели. Проведенные численные эксперименты показали преимущества и узкие места подхода, в целом оправдавшего свое прямое назначение.

1. Физико-математическая постановка задачи и общий численный подход

В рамках решения общей задачи напыления возникает множество различных подзадач, связанных с отдельными технологическими процессами. Основной из них — разгон холодным сверхзвуковым потоком наночастиц и доставка их к разогретой до нужной температуры подложке. При реализации нанопринтинга [2] для этого используется матрица микросопел, позволяющая получить на подложке "рисунок" нужной структуры. При математическом анализе данной технической системы возникает вопрос о параметрах многокомпонентного двухфазного течения газовой смеси с наночастицами в отдельно взятом микросопле и выводящем микрострую канале, а также вопрос взаимодействия струи с подложкой.

В общем случае для моделирования процесса в целом используется макроскопический подход, в котором двухфазное течение газовой смеси с наночастицами описывается в рамках механики сплошной среды с помощью уравнений газовой динамики для компонент газа и уравнения конвекции-диффузии для концентрации наночастиц. В такой постановке задача исследовалась многими авторами (см., например, [3–5]). Однако для систем микронных и субмикронных размеров возникает проблема нарушения гипотезы сплошности, когда длина свободного пробега молекул газа становится сравнимой с элементами геометрии системы.

Ниже нами рассматривается такая модельная геометрия (см. Рис. 1). Из баллона (слева) через микросопло подается в направляющий микроканал газовая смесь, содержащая наночастицы, которые сверхзвуковым потоком доставляются до подложки (справа). В рассматриваемом случае длина свободного пробега принимает значения из диапазона 60 — 600 нм и сравнима с размерами сопел и некоторых видов наночастиц или их кластеров. Таким образом, математическая модель исследуемого течения не может быть полностью сформулирована в рамках макроскопического подхода.

Обычно в данной ситуации для описания течения смеси используют либо уравнения Навье—Стокса со специальными граничными условиями на стенках, либо переходят к решению уравнения Больцмана в том или ином приближении [6]. Оба способа имеют свои преимущества и недостатки. Решение на основе уравнений Навье—Стокса позволяет существенно сократить вычислительные затраты, однако число Кнудсена в рамках такого подхода не может быть больше 0.1. Решение на основе уравнения Больцмана [7–9] получается на порядок более затратным, однако диапазон чисел Кнудсена сверху не ограничен, а снизу ограничен величинами порядка 0.01, поскольку для меньших значений числа Кнудсена вычислительная процедура на базе уравнения Больцмана становится неприемлемой с точки зрения временных затрат.

Имеются однако и альтернативные подходы, в том числе, метод молекулярной динамики (ММД) [7–10]. Использование ММД в полном объеме в принципе уже возможно (см., например, [11–13]), однако для реальных размеров области и конечных промежутков времени оно представляется пока преждевременным, даже при наличии очень мощных суперкомпьютеров. Поэтому, на наш взгляд, наиболее продуктивным подходом к задачам подобного класса может оказаться комбинация макроскопического подхода

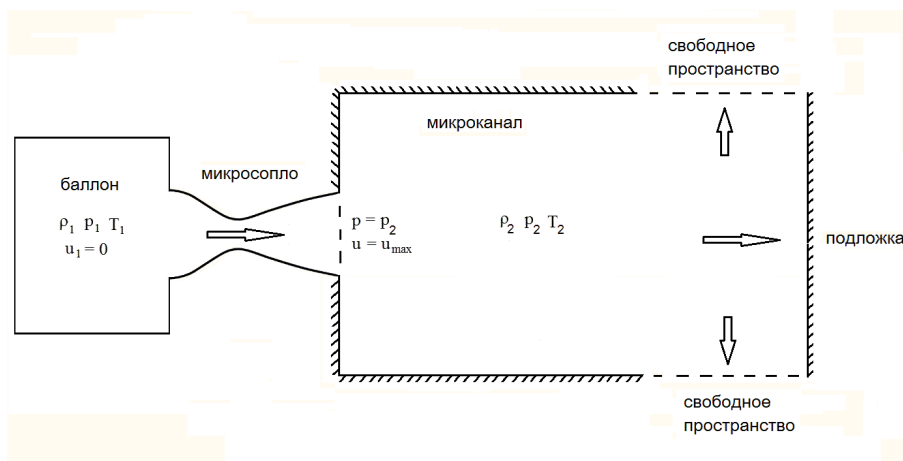


Рис. 1: Геометрия модельной задачи.

(например, на основе уравнений Эйлера, Навье—Стокса или квазигазодинамики), описывающего среднее поле течения, и коррекция характеристик течения с помощью статистических подходов (например, на основе метода крупных частиц, уравнения Больцмана или ММД).

В данной работе использовался комбинированный подход, который базируется на уравнениях квазигазодинамики (КГД) [14], а коррекция параметров течения производилась с помощью ММД. Предложенный общий алгоритм моделирования представлен в [15, 16] и применялся к моделированию течения бинарной смеси водорода и азота в однофазном варианте (без наночастиц). Он представляет собой расщепление по физическим процессам. КГД система рассматривается в релаксационном приближении и является обобщением квазигазодинамических уравнений на случай смеси газов. КГД система решается методом конечных объемов на подходящей сетке. Система уравнений молекулярной динамики используется в качестве подсеточного алгоритма (применяющегося внутри каждого контрольного объема). Эти уравнения решаются с помощью алгоритма Верле [17], записанного в скоростной форме. В рамках МД-вычислений взаимодействие частиц описывается с помощью потенциалов, определяющих основные свойства чистых компонент газовой смеси. Для расчета сил взаимодействия молекул газа между собой и молекулами металлических поверхностей системы используются парные потенциалы Леннарда—Джонса [18, 19].

2. Детали алгоритма и параллельная реализация

В рассматриваемом случае двухфазной среды численный алгоритм аналогичен предложенному в [15, 16], за исключением того, что к системе КГД уравнений добавляется уравнение конвекции-диффузии для концентрации наночастиц. При этом предполагается, что размер наночастиц не превышает 10 нм, что позволяет не выделять кнудсеновский слой вокруг самих наночастиц (хотя в будущем это предполагается). Кроме того, для упрощения задачи не учитывается собственная температура наночастиц (считается, что она совпадает с температурой газовой смеси). Также для упрощения предварительного анализа течения в расчетах не учитывалось наличие подложки на пути струи.

В итоге численная КГД процедура состоит в следующем. На каждом шаге по времени производится сначала предикторный расчет макропараметров компонент газа по сеточным аналогам КГД уравнений без учета обменных членов (последние описывают перераспределение импульса и энергии между компонентами газовой смеси [14, 15]). В результате расчета определяются новые макропараметры компонент газа и смеси в целом в каждом контрольном объеме пространственной сетки.

Далее производится подсеточный расчет с целью вычисления обменных членов. Он осуществляется независимо в каждом контрольном объеме (ячейке) сетки с помощью уравнений молекулярной динамики

и производится с существенно более мелким шагом по времени, связанным с эволюцией молекулярной подсистемы. Критерием останова МД-расчёта является либо достижение характерного времени эволюции молекулярной системы (которое связано с линейным размером ячейки и средней скоростью молекул: $\Delta t \approx l/v$), либо изменение (на 1–2 одного или нескольких макропараметров молекулярной системы (средний импульс, средняя кинетическая или средняя потенциальная энергии). Фактически, если сильных изменений макропараметров не происходит, то расчёт производится до достижения некоторого заданного интервала Δt пропорционального времени максвеллизации молекулярной системы. Например, при сверхзвуковых скоростях в азот-водородной смеси (составляющих от 750 до 3300 нм/нс) и размеров сеточных ячеек порядка 100 нм и более это время составляет несколько десятков наносекунд.

Возврат к макроскопическому уровню вычислений осуществляется путём расчёта обменных членов в каждой точке сетки и коррекцией газодинамических параметров по КГД уравнениям с учётом этих обменных членов. Далее производится решение уравнения конвекции-диффузии для концентрации наночастиц. Затем осуществляется переход к новому слою по времени.

Параллельная компьютерная реализация данного алгоритма предполагает использование достаточно мощного кластера (или суперкомпьютера) с центральной или гибридной архитектурой, имеющего на каждом узле несколько многоядерных центральных и возможно несколько графических процессоров (ЦПУ и ГПУ). Распараллеливание алгоритма производится на принципах геометрического параллелизма и разделения областей. В частности, основной газодинамический расчёт производится по дискретным аналогам КГД уравнений на сетке, распределённой между узлами кластера с помощью техники "domain decomposition" (см., например, [20]). Внутри узла КГД-вычисления распределяются между потоками ЦПУ. Вычисление обменных членов возлагается на графические процессоры при их наличии (в противном случае эти вычисления также производятся потоками ЦПУ). Распараллеливание КГД-вычислений между потоками ЦПУ также производится геометрическим способом.

Распараллеливание МД-вычислений производится путем разбиения всего множества молекул, относящихся к одному узлу сетки, на группы примерно одинаковой мощности. В итоге каждый блок (варп) ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки. Программная реализация алгоритма основана на гибридной технологии MPI+OpenMP+CUDA, представленной нами в [21].

3. Результаты предварительного моделирования.

Предварительная апробация разработанного численного подхода без учета наночастиц проводилась в рамках работ [15, 16]. В них было показано следующее.

1. Разработанный численный алгоритм пригоден для анализа физических процессов в установках СХГН, а его параллельная реализация является достаточно эффективной при проведении расчётов на кластерах и суперкомпьютерах с гибридной архитектурой. При практической реализации удалось выявить критерий принципиальной возможности комбинированного расчёта. Он состоит в том, что доступная кластерная система или суперкомпьютер должны обладать такой конфигурацией, чтобы производить расчёт одного шага по времени по КГД уравнениям вместе с подсеточными вычислениями на выбранной расчётной сетке за время порядка нескольких секунд. В рамках предложенного подхода принципиальная возможность такой реализации определена локальностью подсеточных МД-вычислений.

2. Расчёты течения в рамках упрощенной модельной задачи вдали от стенок микроканала на основе макроскопической КГД-модели при микронных размерах расчётной области качественно согласуются с результатами натурных экспериментов. Для достижения количественного совпадения численных результатов, получаемых с помощью КГД-модели, с результатами натурных экспериментов следует использовать уравнение состояния, согласованное по параметрам с потенциалами взаимодействия молекул, применяемых при МД-вычислениях, а также с экспериментальными данными о свойствах используемых газов. В частности, в качестве уравнения состояния газов можно использовать вириальные уравнения состояния для давления и внутренней энергии.

3. На уровне макроописания моделируемого процесса существует необходимость использования двухтемпературного КГД-описания, предложенного в [22]. Этому есть две причины. Во-первых, часто

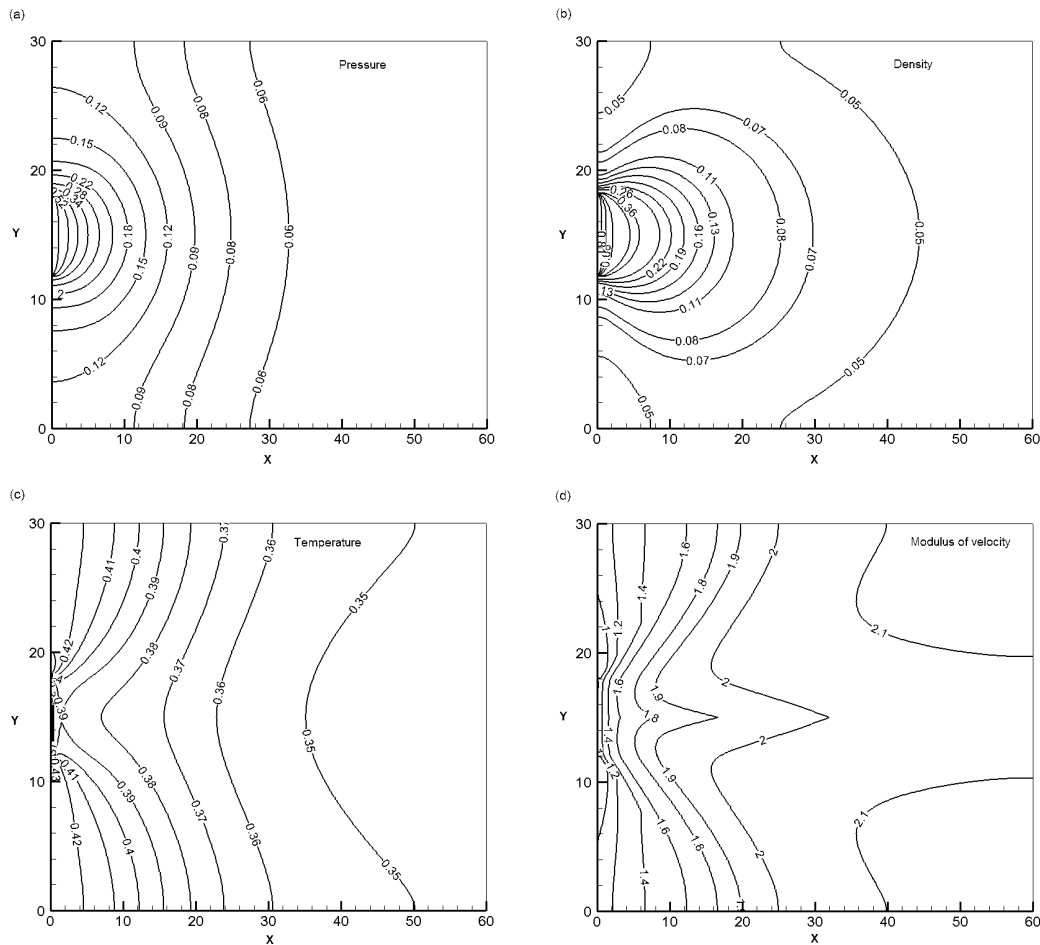


Рис. 2: Изолинии давления, плотности, температуры и модуля скорости.

используемая в установках СХГН азот-водородная газовая смесь в разных подобластях канала имеет температуру из диапазона 80 – 600 К. При этом вблизи нижней границы указанного диапазона молекулы газовой смеси имеют преимущественно три степени свободы, а при комнатных и более высоких температурах — пять. Во-вторых, при взаимодействии газа со стенками микроканала и подложкой образуются отошедшие ударные волны (именно они и должны реализовываться в установках СХГН), которые создают в приповерхностном слое дозвуковое течение с расщепленной поступательной и вращательной температурами газа.

4. Взаимодействие газа со стенками следует учитывать на молекулярном уровне (особенно это будет актуально для подложки), поскольку макроскопические граничные условия не улавливают всей специфики процесса вблизи стенки. В частности, следует учесть проникновение водорода в стенку и подложку системы, а также взаимные превращения поступательной и вращательной энергии газов и колебательной энергии атомов решеток стенок и подложки.

В качестве иллюстрации приведем результаты расчета общей задачи в двумерной прямоугольной области с размерами 60x30 мкм. Диаметр сопла Лавала на срезе составлял 6 мкм. Азот-водородная смесь в баллоне находилась при нормальных условиях ($T = 273$ К, $p = 1$ атм), объёмные доли водорода и азота были равными (1:1). В начальный момент времени в свободном пространстве эта же смесь находилась при давлении $p = 0.01$ атм и температуре $T = 273$ К. КГД-расчет осуществлялся на сетке 901x301, молекулярные вычисления внутри контрольных объемов были трёхмерными. Толщина слоя по третьей

координате была равной 0.1 длины свободного пробега молекул смеси (6.7 нм). Граничные условия при МД-вычислениях были взяты периодическими. Результаты установления течения показаны на Рис. 2. В целом можно отметить, что водород действительно разгоняет смесь до нескольких тысяч нанометров в наносекунду, то есть является регулятором скорости течения. Азот выполняет функцию охладителя течения. В данном случае в результате расширения смесь в окружающем струю пространстве охладилась до 90 К. Именно эти свойства азот-водородной смеси и эксплуатируются в установках СХГН. Параметры итогового течения регулируются в основном геометрией сопел и составом смеси в баллоне.

4. Заключение.

В заключении отметим, что в рамках данной работы представлены вычислительные основы и комбинированный подход к моделированию процессов сверхзвукового холодного газового напыления наночастиц на подложки. Конкретные преимущества и недостатки предлагаемой численной методики выявят последующие детальные исследования. Однако уже сейчас можно отметить большой интерес исследователей во всем мире к подобного рода мультимасштабным вычислениям, ориентированным на использование современных суперкомпьютеров.

ЛИТЕРАТУРА

1. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. — М.: Физматлит, 2010. — 536 с.
2. Resnick D. Nanoimprint lithography. / In "Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems" (Edited by Martin Feldman). — Oxford: Woodhead Publishing Limited, 2014. — 600 p.
3. Wu Yau, Lee C.H. Kinetic Theory of Shock Tube Problems for Binary Mixtures // The Physics of Fluent. — 1971. — V. 14, N. 2. — P. 313–322.
4. Garzo V., Santos A., Brey J.J. A kinetic model for a multicomponent gas. // J. Phys. Fluids A. — 1989. — V. 1, N. 2. — P. 380–383.
5. Ramos A., Tejada G., Fernandez J.M., Montero S. Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence // J. Phys. Chem. A. — 2009. — V. 113. — P. 8506–8512.
6. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. — М.: Издательство иностранной литературы, 1961. — 928 с.
7. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. — М.: Наука, 1967. — 440 с.
8. Бёрд Г. Молекулярная газовая динамика. — М.: Мир, 1981. — 319 с.
9. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow. — Oxford: Oxford Science simulations, 1994. — 479 p.
10. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods. — New-York: John Wiley & Sons, Inc., 1992. — 512 p.
11. Мирный В., Фрэнер М. Об одной программе моделирования молекулярной динамики газа с элементами распараллеливания алгоритма // Вычислительные технологии. — 2001. — Т. 6, № 3. — С. 32–50.
12. Ковалев В.Л., Сазонова В.Ю., Якунчиков А.Н. Моделирование взаимодействия струи разреженного газа с преградой методами молекулярной динамики // Вестн. Моск. ун-та. Матем. Механ. — 2008. — № 2. — С. 56–58.
13. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Исследование течения и теплообмена в микро- и наноканалах методами молекулярной динамики. // Вестн. Моск. ун-та. Матем. Механ. — 2008. — № 5. — С. 67–70.
14. Елизарова Т.Г. Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. Лекции по математическим моделям и численным методам в динамике газа и жидкости. — М.: Научный Мир, 2007. — 350 с.

15. Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Моделирование течений газовых смесей в микроканалах // Вестник РУДН. Серия Математика. Информатика. Физика. — 2014. — № 3. — С. 154–163.
16. Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S. Numerical Simulation of the Gas Mixture Flows on Hybrid Computer Systems. / Electronic Proceedings of The Ninth International Conference on Engineering Computational Technology (Edited by P. Ivanyi and B.H.V. Topping), Naples - Italy, 2–5 September 2014. — Paper 28. — 14 p. — CIVIL-COMP LTD (CIVIL-COMP PRESS & SAXE-COBURG PUBLICATIONS), 2014.
17. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Physical Review. — 1967. — V. 159. — P. 98–103.
18. Lennard-Jones J.E. Cohesion // Proceedings of the Physical Society. — 1931. — V. 43, № 5. — P. 461–482.
19. Фокин Л.Р., Калашников А.Н. Транспортные свойства смеси разреженных газов N₂-H₂ в базе данных ЭПИДИФ // Теплофизика высоких температур. — 2009. — Т. 47, № 5. — С. 675–687.
20. Dongarra J., Foster I., Fox J., Gropp W., Kennedy K., Torczon L., White A. Sourcebook of Parallel Computing. — San Francisco: Morgan Kaufman, 2003. — 852 p.
21. Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // Известия ЮФУ. Технические науки. — 2012. — № 6(131). — С. 105–115.
22. Елизарова Т.Г., Широков И.А. Макроскопическая модель газа с поступательно-вращательной неравновесностью // ЖВМиМФ. — 1999. — Т. 39, № 1. — С. 141–153.

REFERENCES

1. Alkhimov A.P., Klinkov S.V., Kosarev V.F., Fomin V.M. Cold gasdynamics dusting. Theory and practice [Kholodnoe gasodinamicheskoe napylenie. Teoriya i praktika]. — Moscow: Fizmatlit, 2010. — 536 p. (in Russian)
2. Resnick D. Nanoimprint lithography. / In «Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems» / Edited by Martin Feldman. — Oxford: Woodhead Publishing Limited, 2014. — 600 p.
3. Wu Yau, Lee C.H. Kinetic Theory of Shock Tube Problems for Binary Mixtures // The Physics of Fluent. — 1971. — V. 14, № 2. — P. 313–322.
4. Garzo V., Santos A., Brey J.J. A kinetic model for a multicomponent gas // J. Phys. Fluids A. — 1989. — V. 1, № 2. — P. 380–383.
5. Ramos A., Tejada G., Fernandez J.M., Montero S. Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ Mixtures: (I) Zone of Silence // J. Phys. Chem. A. — 2009. — V. 113. — P. 8506–8512.
6. Hirschfelder J.O., Curtiss Ch.F., Bird R.B. Molecular theory of gases and liquids. — London: John wiley and sons, inc., New York chapman and hall, lim., 1954. — 1249 p.
7. Kogan M.N. Dynamics of rarefied gas [Dinamika razrezhennogo gaza]. — Moscow: Nauka, 1967. — 440 p. (in Russian)
8. Bird G.A. Molecular gas dynamics. — Clarendon: Oxford, 1976. — 319 p.
9. Bird G.A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flow. — Oxford: Oxford Science simulations, 1994. — 479 p.
10. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods. — New-York: John Wiley & Sons, Inc., 1992. — 512 p.
11. Mirnyi V., Frener M. About program for simulation of molecular dynamics of gas with parallel elements in algorithm [Ob odnoi programme modelirovaniya molekularnoy dinamiki gaza s elementami rasparallelivaniya algoritma] // Vychislitelnye tekhnologii. — 2001. — V. 6, № 3. — P. 32–50 (in Russian).

12. **Kovalev V.L., Sazonova V.Yu., Yakunchikov A.N.** Simulation of interaction of rarefied gas jet with barrier with the help of molecular dynamics methods [Modelirovanie vzaimodeystviya strui razrezhennogo gasa s pregradoi metodami molekulyarnoy dinamiki] // Vestnik Moskovskogo universiteta. Matematika i mekhanika. — 2008. — № 2. — P. 56–58 (in Russian).
13. **Kovalev V.L., Yakunchikov A.N.** Investigation of flow and heat exchange in micro- and nano-channels with the help of molecular dynamics methods [Issledovanie techeniya i teploobmena v mikro- i nanokanalakh metodami molekulyarnoy dinamiki] // Vestnik Moskovskogo universiteta. Matematika i mekhanika. — 2008. — No. 5. — P. 67–70 (in Russian).
14. **Elizarova T.G.** Quasi-Gas Dynamic Equations, Computational Fluid and Solid Mechanics. — Berlin Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. — 300 p.
15. **Kudryashova T.A., Podryga V.O., Polyakov S.V.** Simulation of gas mixture flows in microchannels [Modelirovanie techeniy gazovykh smesey v mikrokanalakh] // Vestnik RUDN, seriya «Matematika. Informatika. Fizika». — 2014. — № 3. — P. 154–163 (in Russian).
16. **Karamzin Yu., Kudryashova T., Podryga V., Polyakov S.** Numerical Simulation of the Gas Mixture Flows on Hybrid Computer Systems. / Electronic Proceedings of The Ninth International Conference on Engineering Computational Technology (Edited by P. Ivanyi and B.H.V. Topping), Naples - Italy, 2-5 September 2014. — Paper 28. — 14 p. — CIVIL-COMP LTD (CIVIL-COMP PRESS & SAXE-COBURG PUBLICATIONS), 2014.
17. **Verlet L.** Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Physical Review. — 1967. — V. 159. — P. 98–103.
18. **Lennard-Jones J.E.** Cohesion // Proceedings of the Physical Society. — 1931. — V. 43, № 5. — P. 461–482.
19. **Fokin L.R., Kalashnikov A.N.** Transport properties of N₂-H₂ rarefied gas mixture in the EPIDIF data base [Transportnye svoistva smesi razrezhennykh gazov N₂-H₂ v baze dannykh EPIDIF] // Teplofizika vysokikh temperatur. — 2009. — V. 47, № 5. — P. 675–687 (in Russian).
20. **Dongarra J., Foster I., Fox J., Gropp W., Kennedy K., Torczon L., White A.** Sourcebook of Parallel Computing. — San Francisco: Morgan Kaufman, 2003. — 852 p.
21. **Polyakov S.V., Karamzin Yu.N., Kosolapov O.A., Kudryashova T.A., Sukov S.A.** Hybrid supercomputer platform and development of applications for decision of continuum mechanics problems with the help of grid methods [Gibridnaya superkompyuternaya platforma i razrabotka prilozheniy dlya resheniya zadach mekhaniki sploshnoy sredy setochnymi metodami] // Izvestiya YUFU. Tekhnicheskie nauki. — 2012. — № 6(131). — P. 105–115 (in Russian).
22. **Elizarova T.G., Shirokov I.A.** Macroscopic model of gas with translational and rotational non-equilibrium [Makroskopicheskaya model gaza s postupatelno-vrashatelnoy neravnovesnostyu] // Zurnal vychislitel'noi matematiki i matematicheskoi fiziki. — 1999. — V. 39, № 1. — P. 141–153 (in Russian).